



TITLE:

DK法の初期値について(数値計算基本アルゴリズムとそのソフトウェアの研究)

AUTHOR(S):

中田, 多美; 川本, 則行; 名取, 亮

CITATION:

中田, 多美 ...[et al]. DK法の初期値について(数値計算基本アルゴリズムとそのソフトウェアの研究). 数理解析研究所講究録 1988, 648: 105-127

ISSUE DATE:

1988-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/100293>

RIGHT:

DK法の初期値について

筑波大電子・情報 中田 多美 (Tami Nakata)

日本DEC 川本 則行 (Noriyuki Kawamoto)

筑波大電子・情報 名取 亮 (Makoto Natori)

§ 1. ま え が き

代数方程式 $P_n(z) = 0$, ただし

$$P_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n \quad (a_0 \neq 0) \quad (1)$$

の全根を同時に求める解法の1つ, DK (Durand-Kerner) の3次法は, 反復公式

$$\begin{cases} z_i^{(v+1)} = z_i^{(v)} + \phi_i(z_1^{(v)}, \dots, z_n^{(v)}) \\ \phi_i(z_1, \dots, z_n) = \frac{P_n(z_i)/P'_n(z_i)}{1 - \frac{P_n(z_i)}{P'_n(z_i)} \sum_{\substack{j=1 \dots n \\ j \neq i}} \frac{1}{z_i - z_j}} \end{cases}$$

により根を求める方法であり,

i) 全根をほぼ同じ精度で求められる,

ii) 減次操作を必要としないので, 入力した係数の精度が保たれる,

iii) 大域的収束性がある.

ii) 得られた根の誤差評価を Smith の方法により厳密に行うことができる。

という利点がある。

DK法の初期値として一般的に知られている Aberth の初期値は、以下の様にして求める。

n 次方程式 $P_n(z) = 0$ の n 個の根 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ の複素平面上での重心

$$\beta = \frac{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}{n} = -\frac{a_1}{na_0}$$

を中心とし、全根を内部に含むような円の半径 r を求め、その円周上に等間隔に採った点を初期値とする。

半径 r の見積りは、次の様にする。

$z = \zeta + \beta$ とおき、 $P_n(z)$ を ζ の式

$$\begin{aligned} \tilde{P}_n(\zeta) &= P_n(\zeta + \beta) \\ &= c_0 \zeta^n + c_1 \zeta^{n-1} + \dots + c_{n-1} \zeta + c_n \end{aligned}$$

に変換し、更に

$$\tilde{g}_n(x) = |c_0|x^n - |c_1|x^{n-1} - \dots - |c_{n-1}|x - |c_n|$$

を作る。 $\tilde{g}_n(x)$ は、 $x > 0$ の範囲に唯一つの根 r (実数) をもち、 $\tilde{P}_n(\zeta)$ の任意の根 ζ の絶対値は r を越えないことがわかっている。また

$$r \leq r^+ = \max_{k=1 \dots n} (m |c_k / c_0|)^{\frac{1}{k}} \quad (m: c_1, \dots, c_n \text{ の中で零ではないものの個数})$$

より、 r の近似値 R_0 は、 r^+ と 0 を初期値とした $\tilde{g}_n(x)=0$ に対する二分法により求まる。

この R_0 を用いて

$$z_j^{(0)} = \beta + R_0 \exp \left[i \left(\frac{2\pi(j-1)}{n} + \frac{3}{2n} \right) \right] \quad (j=1, 2, \dots, n) \quad (2)$$

により初期値を求める。

数値実験では、刻み幅が $r^+/2^{20}$ 、または $|\tilde{g}_n(x)| < 10^{-18}$ となるまで分割を行なった。これは、Aberth の半径と、他の方法との比較をするためにあえて厳密な値を得るためである。

(また、高次でもよい近似値が求められるように、ニュートン法は用いなかった。)

Aberth の初期値は、方程式が高次になるにつれて半径の見積りが大きくなりすぎる傾向がある(図1)。一方DK法は、初期値が根と離れていると反復回数が多くなる。そこで Aberth の方法に代わる一般性をもった初期値を考え、DK法の収束の効率を高める工夫を行なった。

§2. 初期値の改良

Aberth の初期値に代わる新しい初期値を求めるために、全根を内に含むなるべく小さな半径を用いる方法(方法1)と、各根からの距離の二乗の和が最小となるような半径を用いる方法(方法2)を考える。

初めに、新しい初期値を求める際に使用する定理を述べる。

〈単位円内外の零点の個数を求める定理〉 ([1] p.119, 定理12.9)

n 次多項式

$$\varphi(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n \quad (a_0 \neq 0)$$

から出発して、 $\varphi_0(z) = \varphi(z)$ とおき、多項式の列

$$\varphi_l(z) = a_0^{(l)} z^{n_l} + a_1^{(l)} z^{n_l-1} + \cdots + a_{n_l-1}^{(l)} z + a_{n_l}^{(l)} \quad (a_0^{(l)} \neq 0)$$

を、

i) $|a_0^{(l)}| < |a_{n_l}^{(l)}|$ のときには

$$\varphi_{l+1}(z) = \varphi_l(z) - \frac{a_0^{(l)}}{a_{n_l}^{(l)}} \tilde{\varphi}_l(z) \quad (3)$$

ii) $|a_0^{(l)}| > |a_{n_l}^{(l)}|$ のときには

$$\tilde{\varphi}_{l+1}(z) = \tilde{\varphi}_l(z) - \frac{\overline{a_{n_l}^{(l)}}}{a_0^{(l)}} \varphi_l(z) \quad (4)$$

により定義する ($l=0, 1, \dots$)。

注 ii) においては、 $\varphi_{l+1} = \widetilde{(\tilde{\varphi}_{l+1})}$ により求める。

$$\text{また、} \tilde{\varphi}_l(z) = \overline{a_{n_l}^{(l)}} z^{n_l} + \overline{a_{n_l-1}^{(l)}} z^{n_l-1} + \cdots + \overline{a_1^{(l)}} z + \overline{a_0^{(l)}}$$

$\varphi(z)$ が単位円周上に零点を持たず、かつ、 $n_l=0$ に行きついたら、

どの l に対しても $|a_0^{(l)}| = |a_{n_l}^{(l)}|$ と行かない

ならば、次々と $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ が定義できて、ある $m (\leq n)$ に対して

$$\varphi_m(z) = \text{定数} \neq 0 \quad (n_m = 0)$$

としたり、 $\varphi(z)$ の単位円内の零点の個数 N_- 、単位円外の零点の個数 N_+ は

$$\begin{cases} N_- = \sum_{l: |a_0^{(l)}| > |a_{n_l}^{(l)}|} (n_l - n_{l+1}) \\ N_+ = \sum_{l: |a_0^{(l)}| < |a_{n_l}^{(l)}|} (n_l - n_{l+1}) \end{cases}$$

で与えられる。

これより、多項式 $\varphi(z)$ の零点がすべて単位円内にあるための必要十分条件は、 $\varphi_0 = \varphi$ から出発して (4) により $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ (=定数 $\neq 0$) が定められて、その間のすべての l に対して $|a_0^{(l)}| > |a_{n_l}^{(l)}|$ であることである。

方法 1

全根を内に含む円の半径を十分小さく見積る。初期値が根に近い分だけ、速い収束が期待される。

$z = R\omega + \beta$ とおき、 $P_n(z)$ を ω の式

$$\begin{aligned} Q(\omega) &= P_n(R\omega + \beta) \\ &= (C_0 R^n) \omega^n + (C_1 R^{n-1}) \omega^{n-1} + \dots + (C_{n-1} R) \omega + (C_n) \end{aligned}$$

に変換し、前述の定理を用いると、中心 β 、半径 R の円内に $P_n(z)$ の根が全て含まれるかどうかを判定できる。

Aberth の半径 R_0 と 0 を初期値とする二分法により、全根を内に含む十分小さい円の半径 R_1 を求めることができる (図 1)。

(2) 式の R_0 を R_1 に置き換え、新しい初期値とする。

数値実験では、分割を 10 回行った。

方法 2

Aberth の方法や方法 1 では、例えば一根の絶対値が他の根の絶対値に比べ極端に大きいために半径の見積りが大きくなり、収束が遅くなっている場合も考えられる。そこで各根からの距離の二乗の総和が最小となるような半径を用いれば、根の分布によらず反復回数がある程度にみさえられることが期待される (図 2)。

方法 1 で求めた半径 R_1 を二分割しながら、各半径の円の内外の根の個数を調べる。J 回の反復で幅 $R_1 \times (\frac{1}{2})^J$ の円環 D_i ($i=1, 2, \dots, m$, $m \leq 2^J$), $\bigcap_{i=1, \dots, m} D_i = \phi$, $\forall D_i \neq \phi$, $\bigcup_{i=1, \dots, m} D_i \supset \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ が求まる (図 3)。

円環 D_i の内径と外径の平均を R_i^* , D_i に含まれる根の個数を N_i とすると、求める半径 R_2 は、

$$R_2 \doteq (\sum_{i=1}^m R_i^* \times N_i) / n$$

で得られる。

(2) 式の R_0 を R_2 で置き換え、新しい初期値とする。

分割回数 J を増やせば、より厳密に R_2 の値が得られるが、

ここではおおよそのものがわかればよいので J は数回程度でよい。数値実験では、J=3 を用いた。

演算の手間

方法 1, 2 の初期値は定理を各々数回用いて得られるので、初期値を求める演算の手間が、その初期値を用いることにより減少する DK 法の演算の手間の分を下回れば、収束の効率が上がったことになる。

演算の手間の比較は、必要は演算回数をすべて実数演算に換算し、加減算：1.7, 除算：2.3, \exp ：17, \log ：11 の重みをつけた演算時間の比較で行なった。

この重みは、数値実験に使用した PC9801E で Pro FORTRAN (倍精度) によって実験した結果を用いた。

これより DK 法の反復 1 回に必要な演算の手間と、定理 1 回の判定に必要な演算の手間の比は、

$$\frac{\text{DK 法}}{\text{定理}} = \frac{5.4n^2 + 51.9n - 14.5}{43.4n^2 + 13.8n} \rightarrow \frac{1}{8} \quad (n \rightarrow \infty)$$

となり、高次になると定理の判定には、DK 法の反復計算の約 $1/8$ の手間しか必要としないことになる。数値実験を行なった $n=5 \sim 80$ では、約 $1/5$ となる。

数値実験では、各初期値別の反復回数、並びに初期値を求める演算回数を DK 法の反復回数に換算した値を比較した。2 つの数の和が小さいほど効率のよい初期値である。(実験結果の反復回数に端数が出ているのは、収束した根に関して反

復を停止するので、その分を差し引いたためである。) (図8, 13 ~ 16)

§ 3. DK法の誤差解析と収束判定

3.1 Smithの方法による誤差解析

DK法の各反復段階における近似値 $z_i^{(n)}$ ($i=1, \dots, n$) に含まれる誤差は、Smithの方法により厳密に見積ることができる。

与えられた相異なる z_1, \dots, z_n に対して行列

$$A = \begin{pmatrix} z_1 + \varphi_1(z) & \varphi_1(z) & \cdots & \varphi_n(z) \\ \varphi_2(z) & z_2 + \varphi_2(z) & & \varphi_2(z) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(z) & \cdots & & z_n + \varphi_n(z) \end{pmatrix}$$

$$\varphi_i(z) = \varphi_i(z_i, z) = \frac{p_n(z_i)/a_0}{\prod_{\substack{j=1, \dots, n \\ j \neq i}} (z_i - z_j)} \quad \left(\begin{array}{l} \varphi_i \text{ は DK 2次法の} \\ \text{反復公式} \end{array} \right)$$

を考える。

行列 A の特性多項式 $\chi(\lambda; A) = \det(\lambda I - A)$ は次のようになる。

$$\chi(\lambda; A) = \det(\lambda I - A) = \prod_{i=1}^n (\lambda - z_i) + \sum_{i=1}^n \left(\prod_{\substack{j=1, \dots, n \\ j \neq i}} \frac{\lambda - z_j}{z_i - z_j} \right) p_n(z_i)/a_n$$

上式の右辺は λ の n 次多項式で λ^n の係数は 1 に等しい。さらに n 個の相異なる複素数値 z_1, \dots, z_n に対して、 $\lambda = z_i$ における値は $p_n(z_i)/a_0$ に等しい。ゆえに

$$\chi(\lambda; A) = p_n(\lambda)/a_0$$

である。このことは $p_n(z) = 0$ の根 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ が行列 A の固有

値と一致することを示す。すなわち $P_n(z) = 0$ の根 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ は

A に対する Gershgorin の円

$$C_i = \{z \mid |z - (z_i - \varphi_i(z))| \leq (n-1) |\varphi_i(z)|\} \quad (i=1, \dots, n)$$

の合併 $C = \bigcup_{i=1}^n C_i$ の各連結成分の中に、その連結成分を構成する C_i の個数と等しい個数ずつ存在する。各 z_i が α_i に十分近く、 α_i が単根なら C_i は他の円と分離されるので、 z_i の誤差は

$$|z_i + \varphi_i(z) - \alpha_i| \leq (n-1) |\varphi_i(z)|$$

あるいはもっと粗く

$$|z_i - \alpha_i| \leq n |\varphi_i(z)|$$

で厳密に見積ることができる。

数値実験では後者を採用した。

3.2 収束判定

$P_n(z)$, $P'(z)$ の値の計算、および変数変換した式の係数の計算には、Honer 法を用いた。Honer 法は丸め誤差の面や、計算回数 の面から、最も良い算法とされている。

Honer 法は、下記の漸化式で表わされる。

$$\left. \begin{aligned} b_0 &= a_0 \\ b'_k &= z \cdot b_{k-1} \\ b_k &= b'_k + a_k \quad (k=1, \dots, n) \\ P_n(z) &= b_n \end{aligned} \right\} \quad \text{ここで } a_k \text{ は } P_n(z) \text{ の係数}$$

上式の計算過程で累積される誤差を考える。加、乗算によ

り生じる丸め誤差を E_m (マシンイフレーション) とすると、漸化式

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_0 &= 0 \\ b'_R + \varepsilon'_R &= z (b_{R-1} + \varepsilon_{R-1}) (1 + E_m) \\ b_R + \varepsilon_R &= (b'_R + \varepsilon'_R + a_R) (1 + E_m) \end{aligned} \right\} \quad (R=1, \dots, n)$$

が得られる。 $\varepsilon_R \cdot E_m = 0$ とすると

$$\varepsilon'_R = |z \cdot b_{R-1}| \cdot E_m + |z| \cdot \varepsilon_{R-1}$$

$$\varepsilon_R = |b'_R + a_R| \cdot E_m + \varepsilon'_R$$

となる。 $|b'_R + a_R| \leq \max(|a_R|, |b'_R|, |a_R + b'_R|)$ となるので

$$\varepsilon_0 = 0$$

$$\varepsilon_R = |z| \cdot \varepsilon_{R-1} + E_m \cdot (|b'_R| + \max(|a_R|, |b'_R|, |a_R + b'_R|))$$

となる。 $P(z) = b_n$ であるので $|P(z')| < \varepsilon_n$ ならば、 z' は十分収束した値とみなすことができる。

この判定法の利点は、方程式の次数に対する一般性があることである。求められる根の限界精度は方程式の次数に関係してくるが、この方法ではどのような次数でも目一杯の精度で根が求められた時点で収束したと判定できる。

§ 4. 数値実験

数値実験は以下の二つについて行った。

(1) Chebyshev の数値積分公式

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

の分点 x_i を根としてもつ方程式

$$F_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + \begin{cases} a_{n-1} z & (n: \text{奇数}) \\ a_n & (n: \text{偶数}) \end{cases}$$

$$a_0 = 1, \quad a_{2k} = -\frac{n}{2k} \sum_{j=1}^k \frac{1}{2j+1} a_{2(k-j)} \quad (k=1, 2, \dots)$$

$$(n \rightarrow \infty \text{ のとき, 根は } |(z+1)^{(z+1)/2} (z-1)^{(z-1)/2}| = 2 \text{ の上に並ぶ})^{(2)}$$

方程式の根は係数に敏感なことが多いので、 $F_n(z)$ の係数の計算には多倍長計算を行ない、計算桁数いっばいの精度で求められるようにした。

15 次の各初期値の分布、及び収束の様子を図 4 ～ 7 に示す。

5 ～ 80 次の各初期値による反復回数の比較を図 8 に示す。

図 8 より、15 次以上では、Aberth の初期値は際立って反復回数が多く持っている。方法 1 と方法 2 の初期値は、(初期値を求める手間も考えに入れると) あまり差異はない。これはこの例の根と重心との距離がほぼ一樣であるためと考えられる。

(2) 一様乱数から $z = x + iy$ ($-10 \leq x, y \leq 10$) を生成し、その値を根にもつ方程式。

$$r_{k+1} = ar_k + c \pmod{m}, \quad a = 1229, \quad c = 351750, \quad m = 1664501$$

を用いて $[0, 1]$ 区間の一様乱数を作り、 $[-0.5, 0.5]$ に移動した後 $[-10, 10]$ に拡張した値を順次 x, y に割り当てて z を生成

した。

15, 30, 50, 80 の次数に対し各々 20 組の乱数の根を用いて実験を行った。

図 9 ~ 12 は、 $n = 15$ における 1 つの例である。

図 13 ~ 16 は、次数別の 20 組のデータにおける反復回数を示す。

図 17 は、Aberth の半径の見積りの大きさと、反復回数との比較を示す。

図に見られるように方法 2 では、反復の途中で重心からの絶対値がかたまり大きくなるものが出ることもあるが、今回の実験ではいずれの場合も最終的には収束し、発散した例は 1 つも見られなかった。

図 14 ~ 16 より 30 次以上では Aberth の方法は際立って反復回数が多くなっていることがわかる。方法 1 と 2 の初期値は、次数が上がるにつれて差異が出てきている。また、方法 2 はデータによらず反復回数がほぼ一定している。

図 17 より、次数が高くなると Aberth の半径の見積りは、相対的に大きくなること、および Aberth の半径の見積りが大きい時は反復回数も多くなる傾向があることがわかる。

§ 5. まとめ

2 つの実験結果より、本方法は初期値のとり方により収束の

速度が大きく左右されること、Aberthの初期値は方程式が高次になるにつれて収束がかたまり遅くたりあまり良い初期値とはいえないことが確かめられた。

従ってDK法は、その大域的収束性に頼らずに、根にできるだけ近い初期値を選んで反復計算を始める事が望ましく、具体的には方法2の初期値がAberthの初期値に代わる一般性をもった初期値として有効である。

参考文献

- [1] 伊理正夫：数値計算．(理工系基礎の数学12)，朝倉書店
PP. 106～122, PP. 142～164 (1981)
- [2] 小野令美：Durand-Kerner 法とAberth法を用いた超高次
方程式の数値計算．情報処理学会論文誌
Vol. 20, NO. 5, PP. 399～404 (1979)
- [3] 森 正武：FORTRAN 77 数値計算プログラム (岩波コンピ
ュータサイエンス)，岩波書店，PP. 1～18,
PP. 41～51, PP. 215～235 (1986)

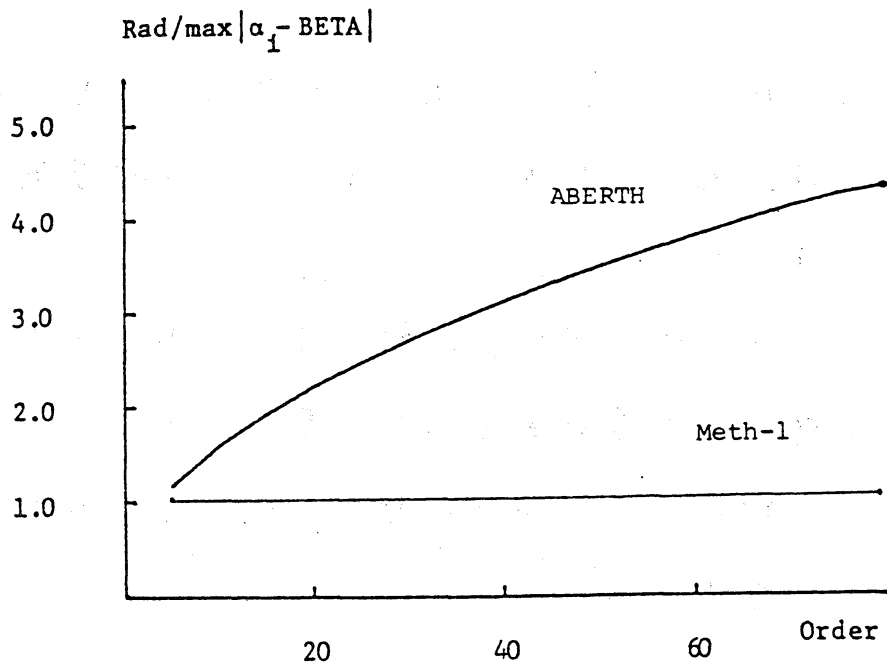


図1 方程式の次数と初期値の半径との関係

Rad: Aberthの初期値、または方法1の半径

α_i : 各根

BETA: 根の重心

例としては Chebysheの数値積分公式の分点を根として持つ方程式を取り上げた

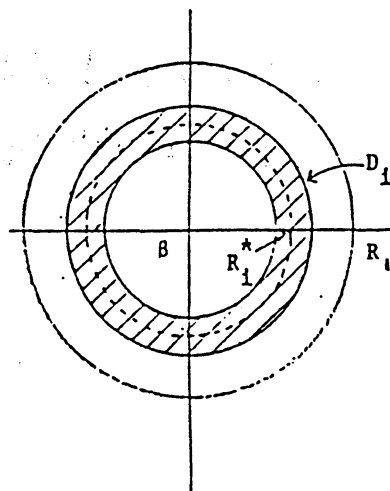
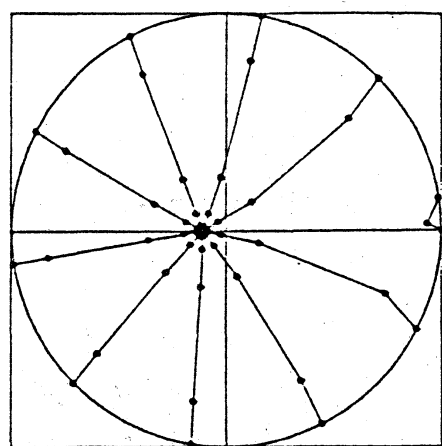
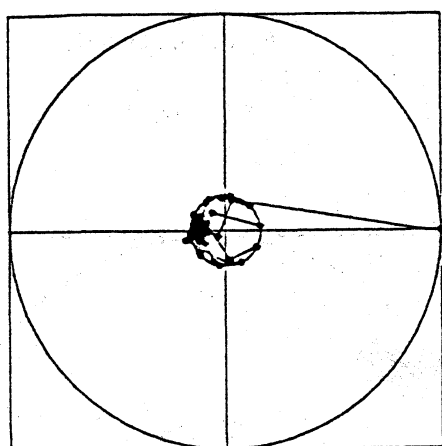
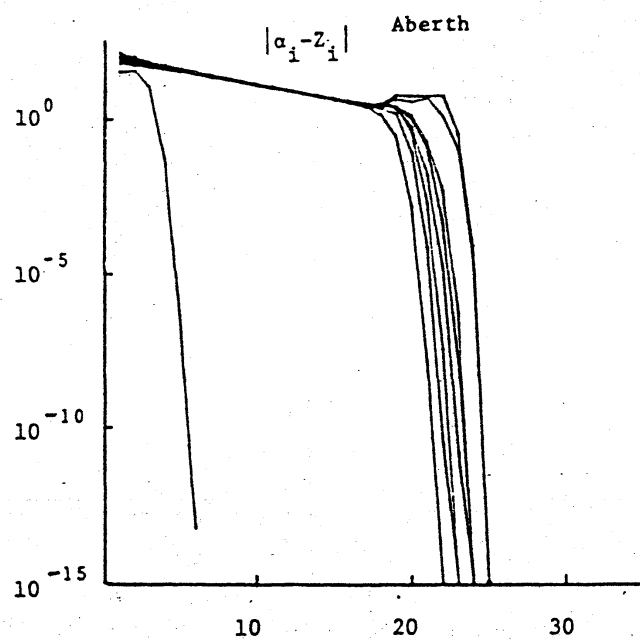


図3



Aberth $R_0 = 0.900001D+02$



Meth-2 $R_2 = 0.146250D+02$

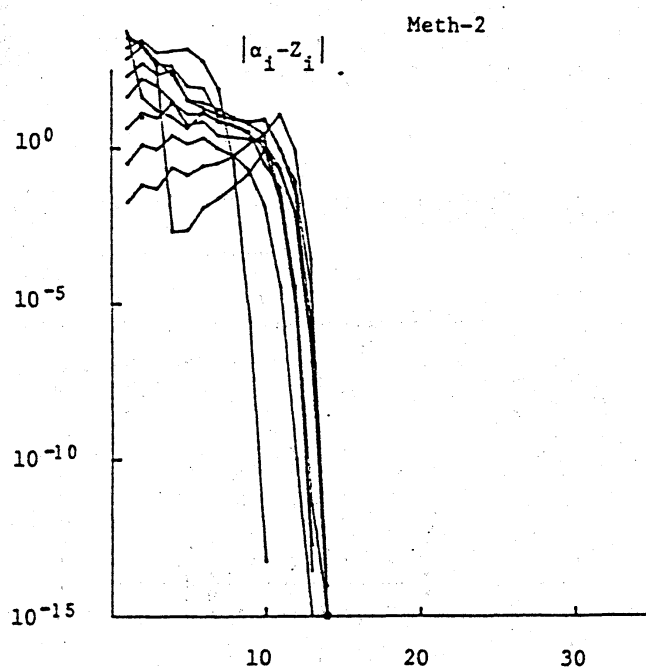


図2 特別な位置関係の根をもった方程式に対する
Aberthの方法と方法2の初期値と収束の様子

$$P(Z) = (z+1)(z-1)(z+i)(z-i)(z+2)(z-2) \\ (z+2i)(z-2i)(z-100)z$$

120

- Aberth
- Meth-1
- ✦ Meth-2

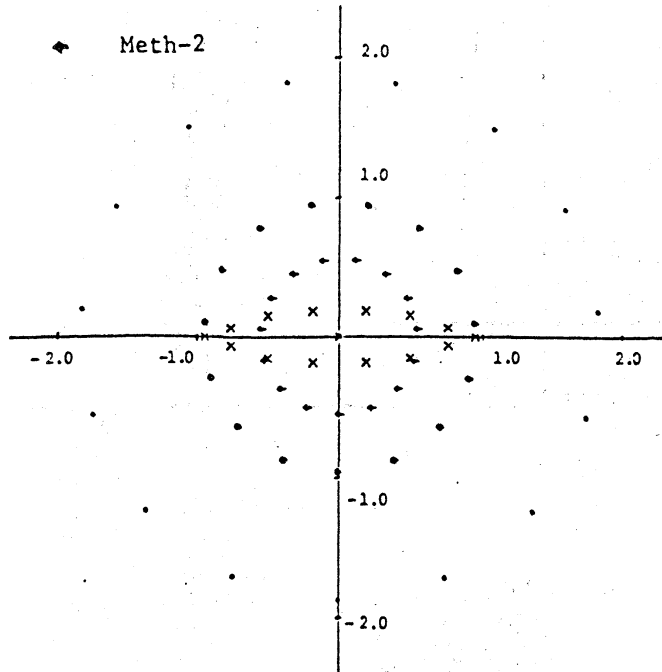
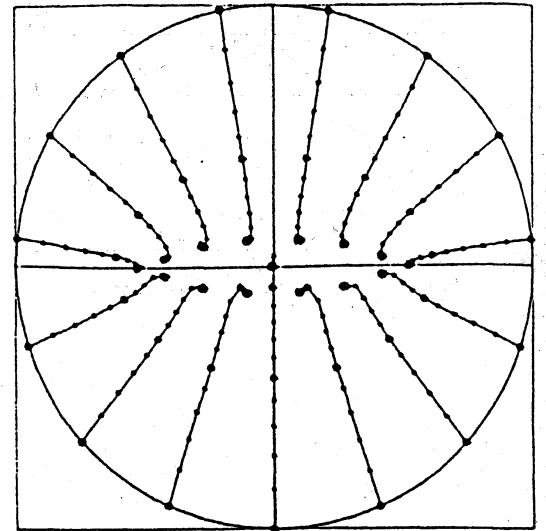
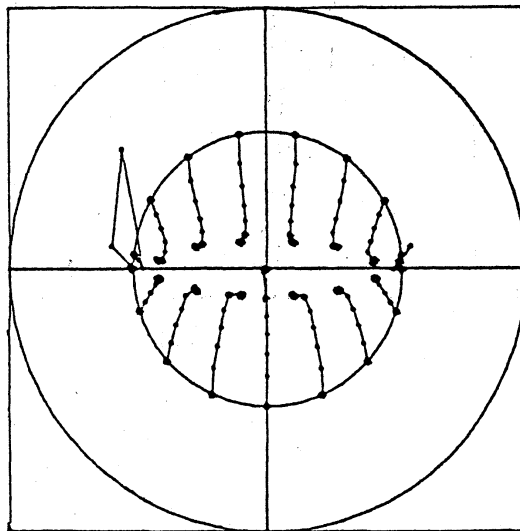


図4 各初期値の分布の様子 (Chebyshev の方程式)



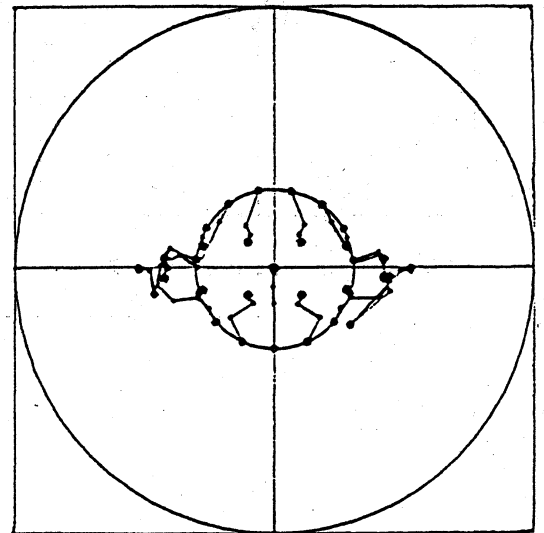
$$R_0 = 0.182229D+01$$

図5 Aberth



$$R_1 = 0.9520298D+00$$

図6 方法1



$$R_2 = 0.550381D+00$$

図7 方法2

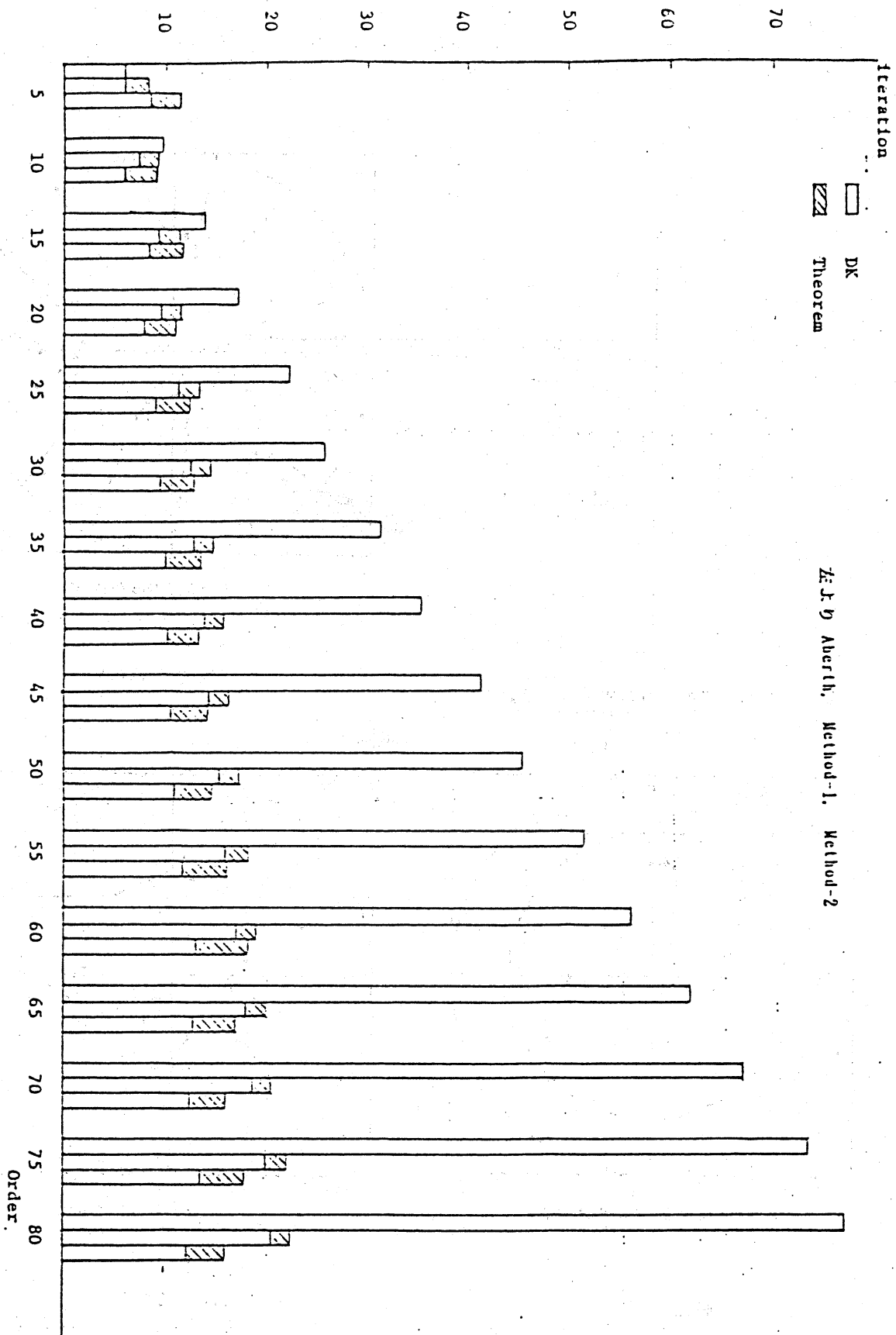


図 8 各次数における反復回数 (Chebyshe の方程式)

• Aberth

• Meth-1

✦ Meth-2

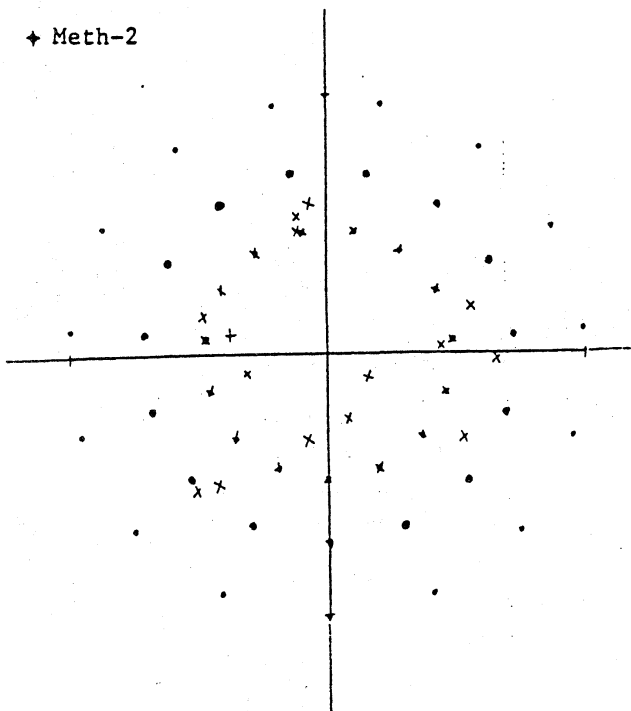
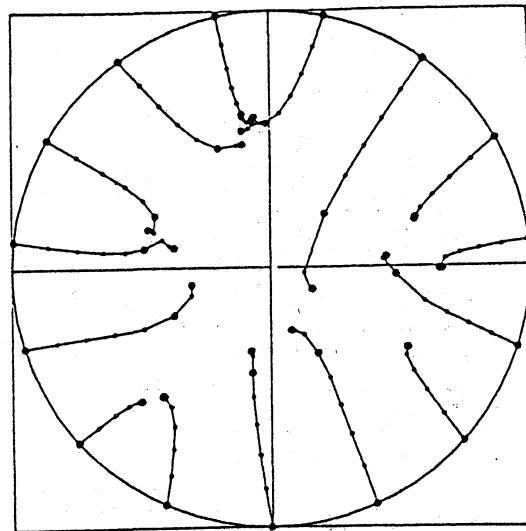
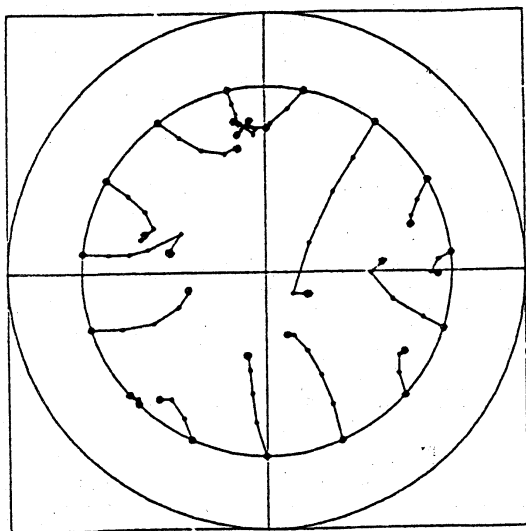


図9 各初期値の分布の様子 (乱数データ)



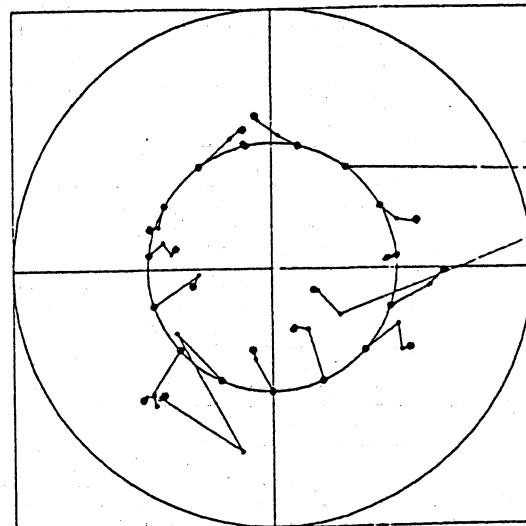
$$R_0 = 0.146676D+02$$

図10 Aberth



$$R_1 = 0.104994D+02$$

図11 方法1



$$R_2 = 0.704334D+02$$

図12 方法2

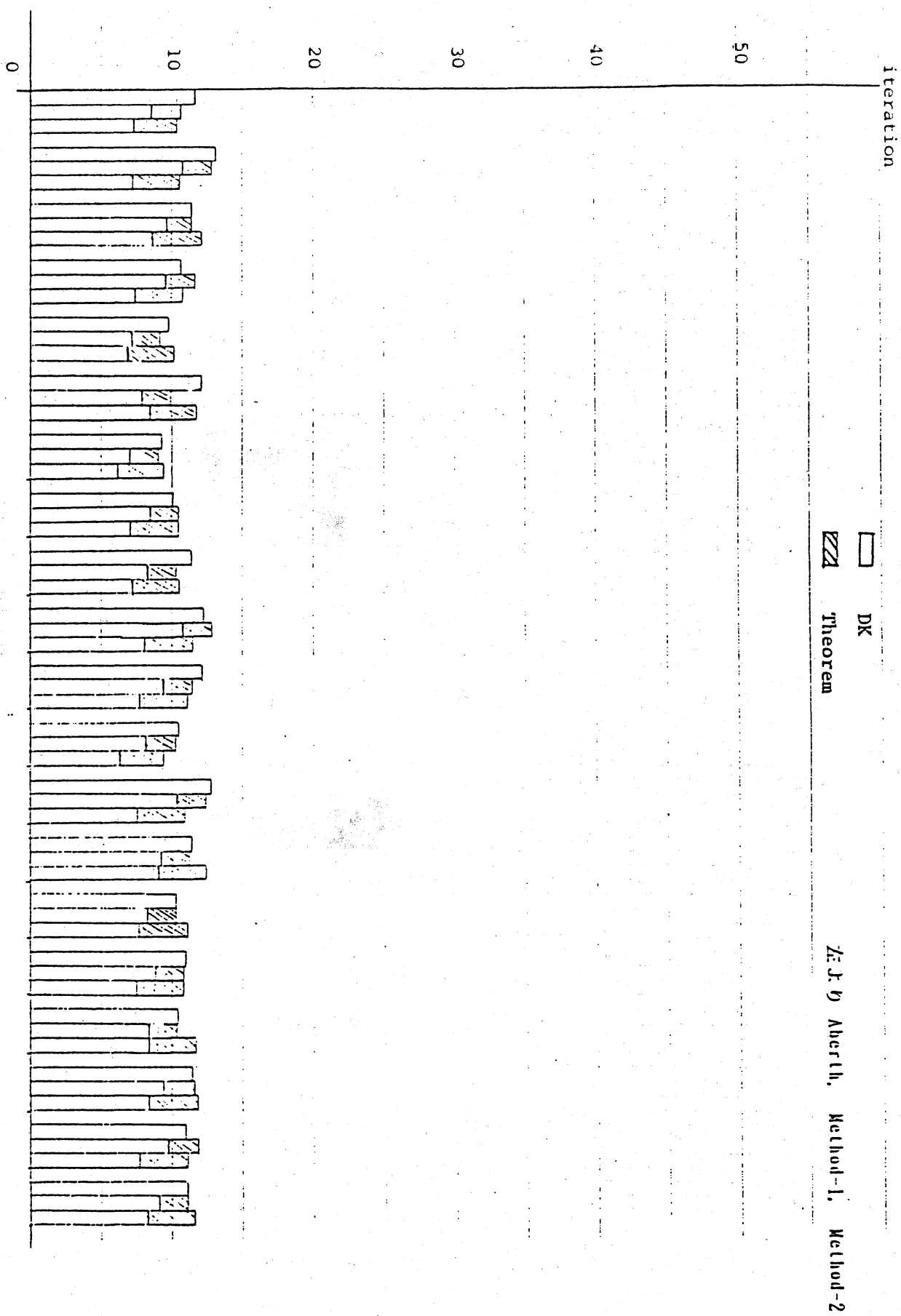


図13 15次における反復回数 (乱数データ)

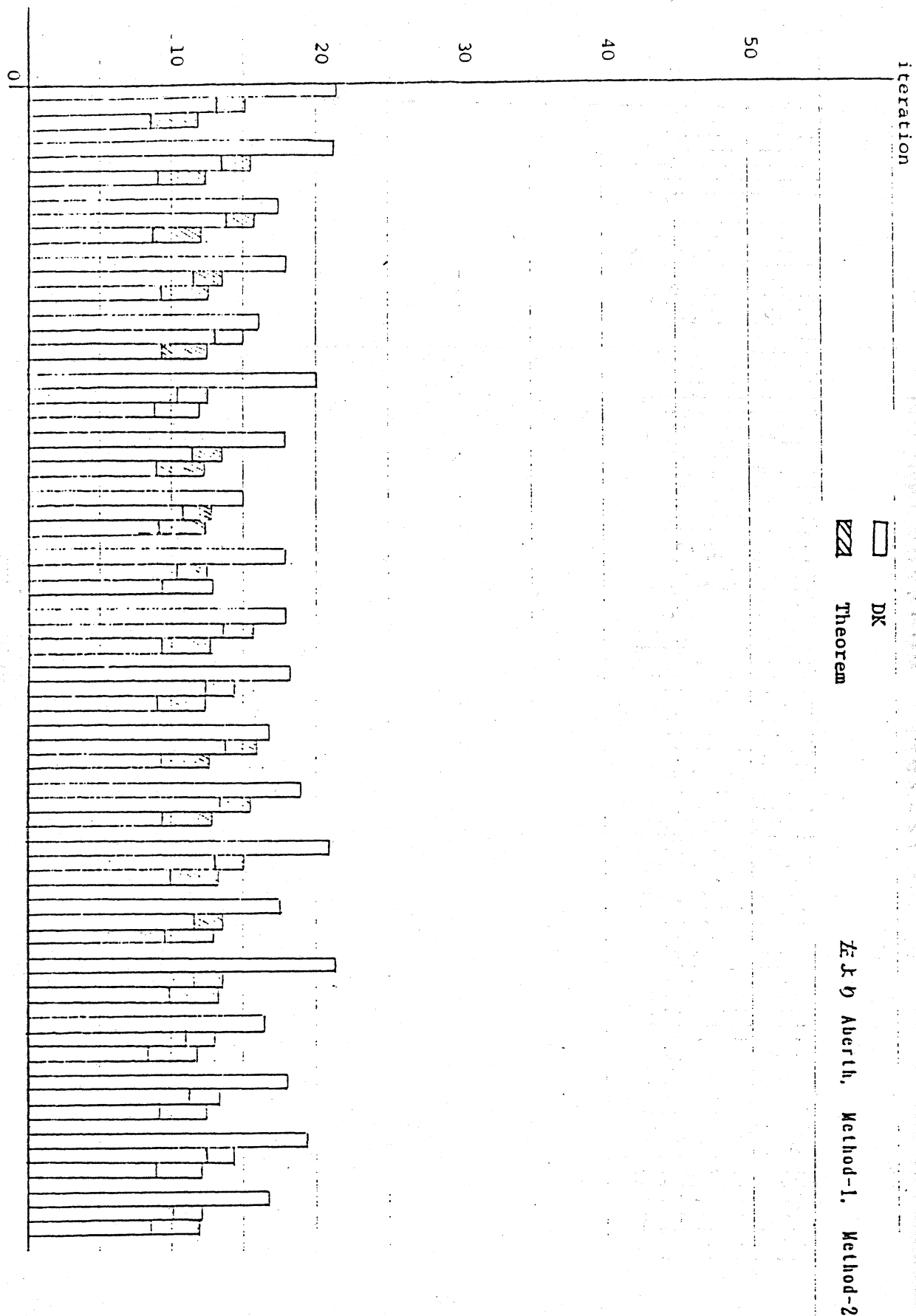


図14 30次における反復回数 (乱数データ)

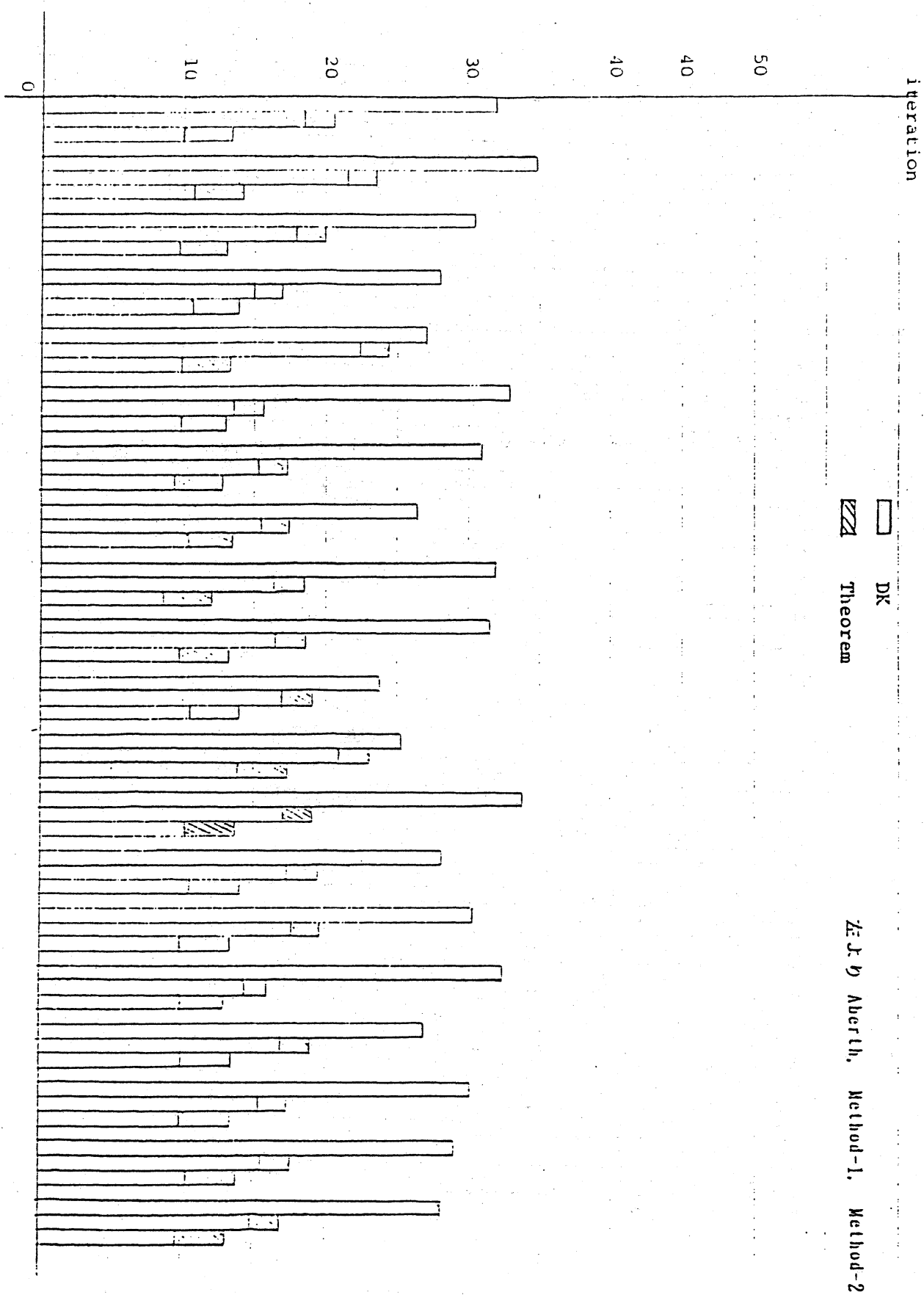


図15 50次における反復回数 (乱数データ)

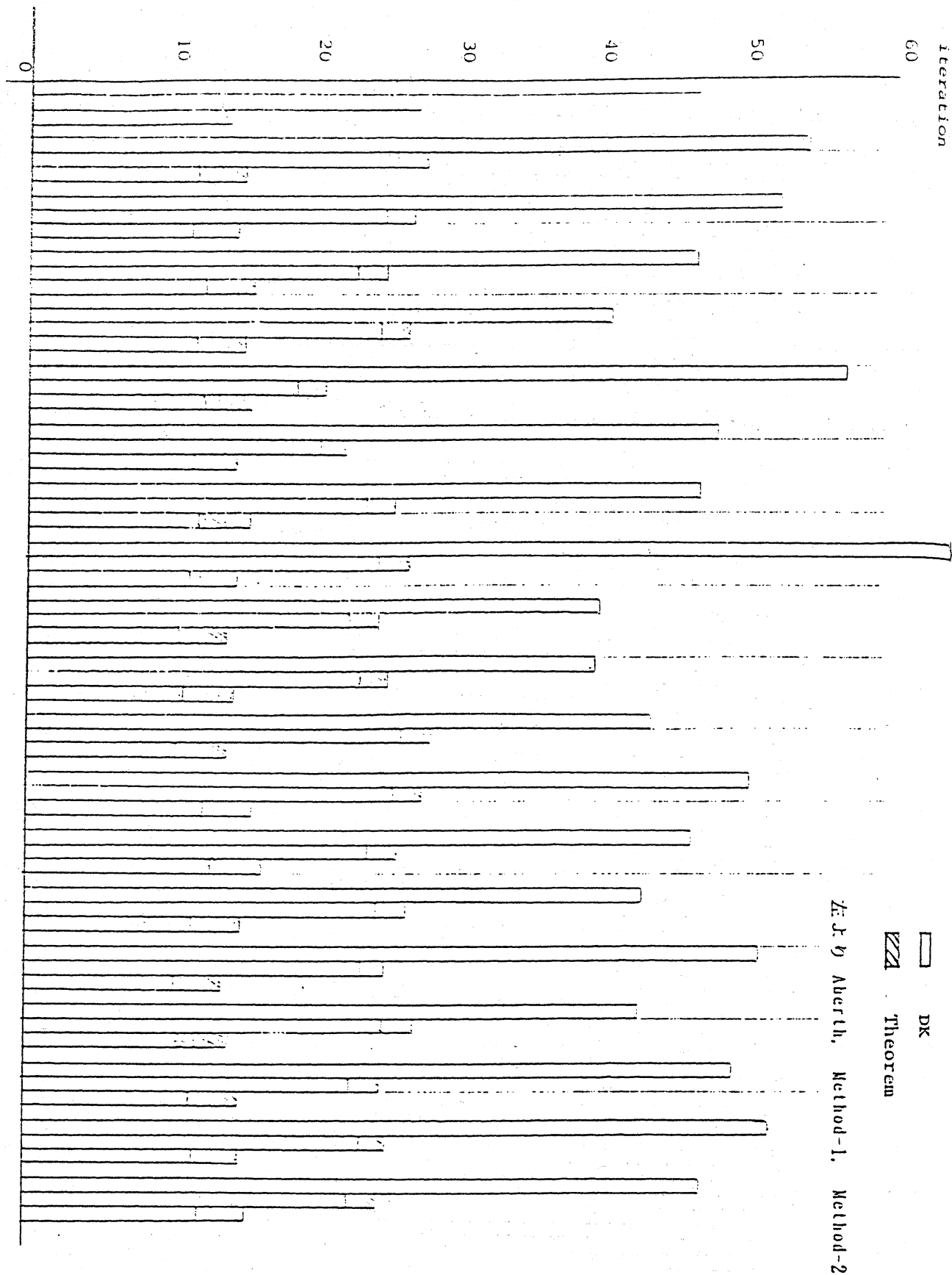


図16 80次における反復回数 (乱数データ)

— iteration
 $\frac{\text{ABERTH}}{\max |z_i - \text{BETA}|}$

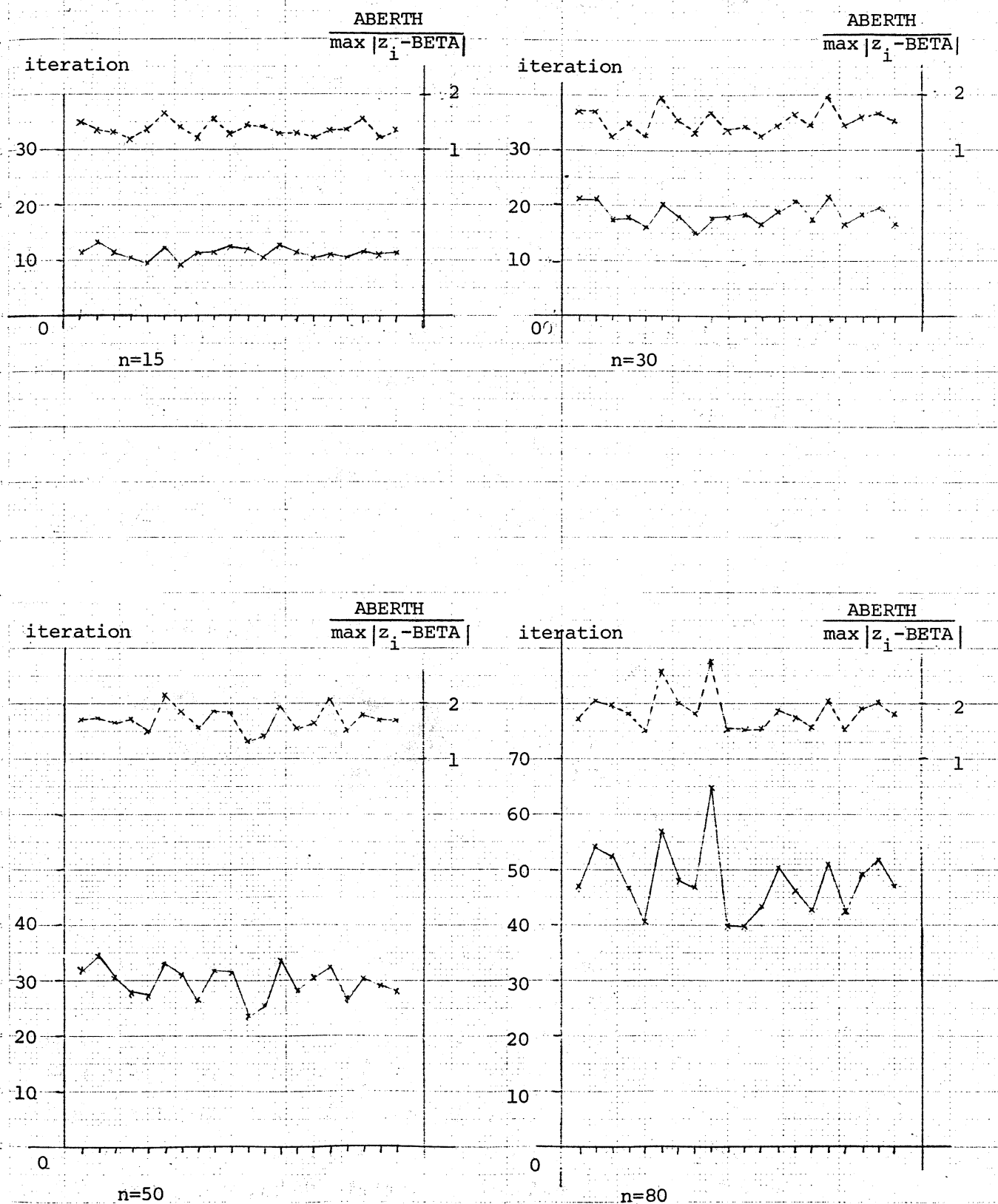


図17 Aberthの半径の見積りと反復回数